

Б

# Спеквин32

Полный  
Документация



программное обеспечение:  
версия 1.72 документация: версия 3.2

© 2015 Доктор. Фридрих Менгес  
83471 Берхтесгаден  
ГЕРМАНИЯ (Европа)  
spekwin32@effemm2.de  
[www.effemm2.de/spekwin/](http://www.effemm2.de/spekwin/)

## СОДЕРЖАНИЕ

1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ.....	5 -
1.1. История развития .....	5 - 1.2.
Описание.....	5 - 1.3. Системные
требования/установка.....	6 - 1.4. Условия
эксплуатации .....	6 -
1,5. Научные цитаты.....	6 -
2. ГЛАВНОЕ ОКНО И ГЛАВНОЕ МЕНЮ.....	7 -
2.1. Главное меню .....	7 -
2.2. Панель значков .....	7 -
2.3. Окно графика.....	7 -
2.4. Статус бар.....	7 -
3. МЕНЮ ФАЙЛ.....	8 -
3.1. Пункт меню [Открыть] .....	8 - 3.2. Пункт меню
[Открыть неизвестный бинарный файл].....	10 - 3.3. Пункт меню
[Вставить данные из буфера обмена].....	10 - 3.4. Пункт меню
[Сохранить].....	11 - 3,5. Пункт меню
[Сохранить данные как].....	11 - 3.6. Пункт меню [Сохранить
для RRUFF].....	11 - 3,7. Пункт меню [Пакетный экспорт
данных].....	11 - 3,8. Пункт меню [Сохранить график
как].....	12 - 3,9. Пункт меню [Сохранить для
Gnuplot].....	12 - 3.10. Пункт меню [Копировать данные в
буфер обмена].....	13 - 3.11. Пункт меню [Копировать графику в буфер
обмена] .....	13 - 3.12. Пункт меню
[Печать].....	13 - 3.13. Пункт меню
[Выход].....	13 -
4. МЕНЮ СПЕКТРЫ.....	13 -
4.1. Пункт меню [Общие].....	13 - 4.2. Пункт меню
[Информация].....	14 - 4.3. Пункт меню
[Нормализация].....	14 - 4.4. Пункт меню [Коррекция базовой
линии].....	15 - 4,5. Пункт меню [Расширенная базовая
настройка].....	15 - 4,6 . Пункт меню [Удаление
шипов].....	15 - 4,7. Пункт меню
[Воспроизведение] .....	16 - 4.8. Пункт меню
[Сглаживание].....	16 - 4.9. Пункт меню [Расширенное
сглаживание] .....	16 - 4.10. Пункт меню [Пики и
FWHM].....	17 -

4.11. Пункт меню [Интеграция].....	17 -
4.12. Пункт меню [Отрезать часть спектра].....	17 - 4.13.
Пункт меню [Сортировка].....	18 - 4.14. Подменю
[Удалить].....	18 -
4.14.1. Пункт меню [Удалить все].....	18 - 4.14.2.
Пункт меню [Выбрать для удаления].....	18 -
4.14.3. Пункт меню [Удалить последний спектр].....	18 -
5. МЕНЮ РАСЧЕТОВ.....	18 -
5.1. Пункт меню [Дополнение].....	18
- 5.2. Пункт меню [Вычитание] .....	19 - 5.3. Пункт
меню [Умножение].....	19 - 5.4. Пункт
меню [Разделение].....	19 - 5.5. Пункт меню
[Усреднение спектров].....	19 - 5,6. Пункт меню
[Константы Y].....	19 - 5.7. Пункт меню [Константы
X].....	20 - 5,8. Пункт меню
[Производная] .....	20 - 5,9. Пункт меню
[Пропускание/Отражение].....	20 - 5.10. Пункт меню
[Степень поляризации].....	20 - 5.11. Пункт меню [Сдвиг
комбинационного рассеяния].....	21 - 5.12. Пункт
меню [Концентрация].....	21 - 5.13. Пункт
меню [Эффективное поглощение] .....	22 - 5.14. Пункт меню
[Центр тяжести].....	22 - 5.15. Пункт меню
[Толщина пленки] .....	22 - 5.16. Пункт меню
[Квантовый выход].....	23 - 5.17. Пункт меню [Низк.
темп. Квантовый выход].....	23 -
6. МЕНЮ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ/ЭЭМ.....	23 -
6.1. Пункт меню [Коррекция чувствительности излучения].....	23 -
6.2. Пункт меню [Назначение длины волны возбуждения].....	23 -
6.3. Пункт меню [Коррекция интенсивности возбуждения].....	-
23 - 6.4. Пункт меню [Удалить рэлеевское/комбинационное рассеяние].....	-
24 - 6,5. Пункт меню [Вычистить пустой набор данных ЕЕМ] .....	25
- 6.6. Пункт меню [Показать 2D-спектр (ЕЕМ)] .....	25 - 6.7. Пункт
меню [Рассчитать спектры возбуждения] .....	25 -
7. МЕНЮ GAUSSFIT .....	25 -
7.1. Пункт меню [Вручную].....	25 -
7.2. Пункт меню [Открыть] .....	26 - 7.3. Пункт
меню [Сохранить].....	26 -

8. МЕНЮ ГРАФИК/ОПЦИИ.....	- 26 -
8.1. Пункт меню [Конфигурация].....	- 26 - 8.2.
Пункт меню [Показать метки пиков].....	- 26 - 8,3.
Пункт меню [Показать вид спектрографа].....	- 26 - 8,4.
Пункт меню [Оси].....	- 27 - 8,5.
Пункт меню [Шрифт осей] .....	- 28 - 8,6.
Пункт меню [Шрифт легенды].....	- 28 - 8,7.
Пункт меню [Легенда вкл./выкл.] .....	- 28 - 8,8.
Пункт меню [Сетка вкл./выкл.].....	- 28 - 8,9.
Пункт меню [Вторичная ось X вкл./выкл.] .....	- 28 - 8,10.
Пункт меню [Точки/Линии].....	- 28 - 8,11.
Пункт меню [Перевернуть ось X].....	- 28 - 8,12.
Пункт меню [Стандартные линии и цвета].....	- 28 - 8,13.
Пункт меню [Толстые линии] .....	- 28 - 8,14.
Пункт меню [Тонкие линии] .....	- 29 - 8,15.
Пункт меню [Печать полностью черным].....	- 29 - 8,16.
Пункт меню [Типы велосипедных линий].....	- 29 - 8,17.
Пункт меню [Отображаемые значения].....	- 29 - 8,18.
Пункт меню [Цвет фона].....	- 29 -

## 1. Общее описание

### 1.1. История развития

Исходное программное обеспечение под названием Spekwin (16-битная версия) было разработано группой Daltrozzo в Университете Констанца в 1997–1998 годах доктором Клаусом Вильсаком с DELPHI1. Он был основан на еще более ранней попытке создать программное обеспечение для отображения спектров, предпринятой доктором Г. Коллманнсбергером с помощью TURBO PASCAL (программа DOS tpblid.exe, до 1994 года). С 1999 года дальнейшая разработка ведется мной. В настоящее время существует 32-битная версия Spekwin32 (разработанная с помощью DELPHI 4) с расширенной функциональностью и значительно увеличенной скоростью работы некоторых функций. Большая часть работы была проведена во время моей работы в аспирантуре в группе Дальтроццо в 2000-2005 годах. После этого скорость разработки несколько снизилась. С 2010 года появилось много новых функций.

### 1.2. Описание

Одной из основных целей Spekwin32 является последовательное отображение спектров, поступающих из разных источников. На данный момент можно прочитать около 36 различных типов спектральных файлов из имеющихся в продаже спектрометрических систем. Используя копирование и вставку через буфер обмена, произвольные данные также можно вводить в Spekwin32 для быстрой визуализации. Неизвестные двоичные файлы можно преобразовать в данные ASCII при первой попытке чтения их содержимого. Spekwin32 способен обрабатывать спектры УФ/ВИД, флуоресценции, БИК, ИК и комбинационного рассеяния света, в то время как основное внимание уделяется УФ/ВИД и флуоресценции.

Spekwin32 позволяет выполнять множество задач над (сериями) спектрами, которые встречаются в лабораторной повседневной жизни (коррекция базовой линии, удаление пиков, нормализация, сглаживание, усреднение, интегрирование, поиск пиков и определение полуширины, отображение меток пиков, расчет концентрации через Ламберта-Бера, коэффициент поглощения и силу колебаний создают спектры рамановского сдвига ...).

Важными функциями флуоресцентной спектроскопии являются: расчет степени поляризации, центра тяжести, квантового выхода флуоресценции; коррекция интенсивности возбуждения спектров флуоресценции, расчет спектров возбуждения по двумерным спектрам флуоресценции, удаление пиков Рэлея и Рамана из данных ЭЭМ, вычитание пустых данных ЭЭМ, отображение двумерных спектров флуоресценции (ЭЭМ) из серий спектров флуоресценции или возбуждения. Функции EEM полезны для предварительной обработки данных, предназначенных для хеометрического анализа.

Для моделирования спектров поглощения существует алгоритм, позволяющий подобрать любую группу Гаусса. кривые для представления спектров.

Для простоты документирования любое количество спектров можно сохранить вместе в виде собственного двоичного файла Spekwin32 или в виде двух типов читаемых человеком файлов ASCII (\*.dat и \*.csv). Спектральные данные также можно экспортировать в два общепринятых формата файлов спектров: файлы JCAMP-DX и THERMO Galactic/GRAMS spc. Функция пакетного экспорта позволяет конвертировать сотни спектров из всех форматов файлов в файлы одного спектра \*.dx, \*.spc и \*.csv. Гемологам понравится

возможность экспорта спектральных данных комбинационного рассеяния света в формат RRUFF. Текущий график можно распечатать, скопировать в буфер обмена или сохранить в виде графики (WMF, GIF, TIFF, BMP и PNG). Для любителей LaTeX могут быть созданы файлы параметров и файлы данных Gnuplot, которые позволяют напрямую создавать файлы EPS. Спектральные данные графика тока также можно скопировать и вставить через буфер обмена.

### 1.3. Системные требования/установка

Spekwin32 будет работать с Win XP/Vista/7/8.1/10. Требования к оборудованию минимальны. Загруженный файл установит полную английскую версию, включая руководство в формате HTML. Также доступна немецкая версия. Пожалуйста, запустите установку в режиме администратора, иначе чтение файлов \*.src не будет работать.

### 1.4. Условия эксплуатации

Spekwin32 предоставляется как бесплатное программное обеспечение для некоммерческого, частного, академического и образовательного использования, включая также некоммерческие организации (например, школы, университеты, организации ООН, государственные органы, полиция, пожарные команды, больницы). В этом случае вам предоставляется право использовать и создавать неограниченное количество копий данного программного обеспечения.

Коммерческое использование без согласия или заказа запрещено. После соответствующего пробного периода вам придется приобрести одноразовую лицензию. Эта лицензия дает вам право на получение бесплатных обновлений и бесплатную базовую поддержку по почте. Одна лицензия действительна либо для одного пользователя на нескольких компьютерах, либо для нескольких человек на одном компьютере, но не для нескольких человек на нескольких компьютерах. Покупка лицензии и оплата осуществляются через Mycommerce/ShareIt.

цена одной лицензии составляет 210 евро (без НДС), также предусмотрены оптовые скидки.

Spekwin32 защищен авторскими правами. Программное обеспечение доступно только через веб-сайт автора, никто другой не имеет права распространять или продавать его, кроме как с разрешения автора. Программное обеспечение не должно быть модифицировано; вы не имеете права декомпилировать или дизассемблировать программное обеспечение или любые его части.

Spekwin32 предоставляется «как есть» и без каких-либо гарантий, явных, подразумеваемых или иных, включая, помимо прочего, какие-либо гарантии коммерческой ценности или пригодности для определенной цели.

Ни при каких обстоятельствах автор этого программного обеспечения не несет ответственности за потерю данных, ущерб, упущенную выгоду или любые другие потери в результате использования или неправильного использования этого программного обеспечения.

### 1,5. Научные цитаты

Если вы используете Spekwin32 в своей научной работе, пожалуйста, ссылайтесь на это программное обеспечение как:

Ф. Менгес «Spekwin32 — программное обеспечение для оптической спектроскопии», версия 1.72.0, 2015 г., <http://www.effemm2.de/spekwin/>

Пожалуйста, введите номер текущей версии и год компиляции из окна Help => about Spekwin32 .... Часть в кавычках можно опустить.

(И пожалуйста: постарайтесь правильно написать! Это не «Speswin-32» и не «Speckwin 32», между «Spekwin» и «32» нет пробелов и дефисов, просто напишите Spekwin32!)

## 2. Главное окно и главное меню.

### 2.1. Главное меню

Доступ ко всем функциям (кроме масштабирования/масштабирования) осуществляется через главное меню.

### 2.2. Панель значков

Доступ к некоторым из наиболее важных функций также можно получить с помощью значков на панели значков.

Назначение значков отображается при кратковременном наведении указателя мыши на них.

### 2.3. Окно графика

Окно графика всегда видимо и состоит из осей с названиями осей, загруженными спектрами и легендой с соответствующими текстами легенды. В качестве типов оси X могут быть длина волны, волновые числа, комбинационный сдвиг и электрон-вольты; В качестве типов оси Y существуют коэффициент пропускания (или коэффициент отражения), поглощение (или интенсивность), эпсилон или логарифм (эпсилон). Если спектр не загружен, названия осей отсутствуют.

Оси можно изменить в [График/Параметры] [Оси]. Шрифт меток оси можно изменить в [График/Параметры] [Шрифт осей], шрифт заголовков осей и заголовков легенды можно изменить вместе в [График/Параметры] [Шрифт легенды]. Их также можно навсегда изменить в [Сюжет/Параметры] [Конфигурация]. Свойства отображения спектров (цвет, тип линии, толщина линии) и соответствующий текст заголовка легенды можно изменить в меню [Спектры]/[Общие].

Кнопки мыши предназначены для увеличения и уменьшения масштаба. Выберите диапазон масштабирования левой кнопкой мыши. Затем программа приближается к следующим меткам оси для прямой нумерации осей. Средняя кнопка мыши перерисовывает окно графика. Правая кнопка мыши производит масштабирование, все спектры будут отображены полностью.

Поле легенды можно перемещать левой кнопкой мыши. Его можно скрыть с помощью [План/Параметры] [Легенда вкл/выкл].

### 2.4. Статус бар

Строка состояния у нижнего края разделена на три части:

- Слева отображается текущее количество загруженных спектров.
- В центре будут отображаться различные программные сообщения.
- Справа текущее положение мыши (ось X | ось Y) непрерывно отображается в единицах измерения осей графика.

### 3. Меню ФАЙЛ

Меню «Файл» содержит все функции открытия, сохранения, печати и экспорта спектров.

Внизу вы найдете список последних использованных файлов Spekwin32 (только файлы \*.spv).

#### 3.1. Пункт меню [Открыть]

Несколько файлов можно выбрать одновременно обычным способом. При загрузке выбранных файлов спектров статус процедуры считывания отображается в средней части строки состояния.

Если возможно, типы осей x и y выбираются в соответствии с последним открытым файлом спектра.

В настоящее время распознаются следующие форматы файлов (коллекцию примеров файлов можно найти на веб-сайте Spekwin32):

---

*.abs	Формат файла ASCII программного обеспечения SpectraWiz от StellarNet. Расширения файлов объяснены:
*.trm	.abs — Поглощение
*.ssm	.trm — пропускание
*.irr	.ssm — режим области действия
*.lib	.irr — режим освещенности (может быть любая единица измерения от ватт до канделы)
	.lib — файл библиотеки для LIBS и Raman.

---

- Формат файла ASCII спектров поглощения диодной матрицы Milton Roy MR3000 \*.asc: абсорбционный спектрометр. Тип оси Y файла определяется автоматически.

- Формат файла ASCII спектров поглощения Beckman Coulter DU 600/7000.

абсорбционные спектрометры. •

Формат файла ASCII базы спектральных данных Геологической службы США.

---

\*.csv: формат файла ASCII (csv = значения, разделенные запятыми) спектров из разных источников:

- Спектры поглощения абсорбционного спектрометра Varian Cary 50 (программное обеспечение: Cary WinUV). Будут считаны спектры пропускания и поглощения.

- Спектры поглощения абсорбционного спектрометра Hewlett Packard 8453.

- ИК-спектры спектрометра Bio-Rad FTS 3000 MX (программное обеспечение: Varian Solution Pro).

- Спектры поглощения спектрометра Scinco Neosys 2000 (Программное обеспечение: Lab Pro Duo).

- Спектры поглощения спектрального программного обеспечения WTW photoLab.

- Спектры поглощения термоэлектронного спектрометра Helios Alpha.

- многостолбцовый (1 – много), многоформатный (все спектральные типы) CSV-файл, созданный самим Spekwin32.

---

\*.dat: формат файла Spekwin32 ASCII. Содержит любое количество спектров вместе с названием их легенды.

Программа всегда принимает значения y как поглощение, поэтому будьте осторожны, если вы сохранили спектры в другом типе шкалы y.

---

\*.dsp Бинарный формат файла спектров из программного обеспечения Ascanis Lambda-SPX/VISIONlite.

---



---

\*.dx: JCAMP-DX 4.24/5.00 – формат файла UV/VIS, рамановских и ИК-спектров. Спектры ЯМР и МС не будут считываться!! Спектры, закодированные DIFDUP и ASDF, также не будут считываться.

Протестировано программное обеспечение Perkin Elmer: UVCSS и FLDM (программное обеспечение DOS), UV-Winlab и FL-Winlab. Дополнительные тестовые спектры были доступны в Bio-Rad DigiLab, Mattson Instruments, Galactic Industries Lab Calc и GRAMS, Sadtler, Jasco HPLC System, веб-книге NIST Chemistry WebBook, на сайте IUPAC JCAMP и на сайте JCAMP Роберта Дж. Ланкашира.

---

\*.fak: Простой формат файла ASCII для импорта ваших собственных данных. Пары XY, разделенные табуляцией, по одной паре в строке, точка или запятая в качестве десятичного разделителя, необязательный заголовок: если в первой строке указаны волновые числа или 1/см, см<sup>-1</sup> или см<sup>-1</sup>, предполагается, что тип оси X представляет собой волновые числа, по умолчанию — длина волны в нм. Также пытается определить тип оси Y. Диалоговое окно автоматического запроса типов осей, если они неясны из файла.

---

\*.ggg: формат файла одного из наших самодельных спектрометров.

---

\*.jws Бинарный формат файла от спектрометров JASCO.

---

\*.prn: • Формат файла ASCII программного обеспечения Princeton Instruments WinSpec 1.6 (16 бит) для ПЗС-камер от Princeton Instruments. Сохраните в Winspec как ASCII-1 или ASCII-XY.  
• Формат файла экспорта ASCII программного обеспечения Horiba DataMax.

---

\*.proc Бинарный формат файла из программного обеспечения Ocean Optics SpectraSuite, внутри формат называется «OOIBinary».

---

\*.ерунда Формат файла ASCII спектров комбинационного рассеяния из онлайн-базы данных минералов RRUFF.

---

\*.scn Бинарный формат файла спектров поглощения Beckman Coulter DU 600/7000.  
абсорбционный спектрометр.с.

---

\*.sp: Двоичные форматы файлов и ASCII-спектров поглощения, флуоресценции, ИК- и комбинационного рассеяния спектрометров PERKIN ELMER. Протестированное программное обеспечение: UVCSS (программное обеспечение DOS), CFS (программное обеспечение DOS для LS-3B, LS-4B и LS-5B), UV WinLab, FL WinLab. Спектры комбинационного рассеяния Перкина-Элмера были доступны в базе данных С.Б. Энгельсена по спектрам комбинационного рассеяния углеводов. Перед отображением значения ординат спектров флуоресценции делятся на 250.

---

\*.sprc: • Бинарный формат файла спектрометров SHIMADZU UV-1600 и UV-1800.  
• Формат бинарного спектрального файла Thermo Fisher (разработан компанией Galactic Industries Corporation). Программное обеспечение: ГРАМС/ИИ. Квазистандарт, используемый многими другими поставщиками (например, Ocean Optics, Jobin Yvon Horiba). Протестированные спектральные типы: УФ/ВИД, БИК, FTIR, Рамановское рассеяние, флуоресценция. Не читает файлы sprc из XRF-анализаторов EDAX, это другой формат файлов. Для этих файлов используйте «EDAX Spectrum Viewer».

---

---

\*.spe: двоичный формат файла программного обеспечения Roper Scientific/Princeton Instruments WinSpec/WinView (16-битная и 32-битная версии). Возможные типы оси x: длина волны, абсолютные и относительные волновые числа (для спектров комбинационного рассеяния света).

---

\*.spk Формат файла ASCII спектров поглощения абсорбционного спектрометра с диодной матрицей IKS XDAP (в настоящее время IKS называется ахеоп в Оберхаузене, Германия).

---

\*.spv: собственный формат двоичных файлов Spekwin32. Содержит произвольное количество спектров. Названия легенд и другие свойства отдельных спектров сохраняются.

Изменен формат файла в версиях 1.68.1 и 1.69.2! Более ранние версии программы не могут читать более поздние спектральные файлы \*.spv.

---

*.trt	Формат файла ASCII программного обеспечения Avantes. Протестировано: Avantes SpectraWin Basic 5.0 и Avantes
*.tat	Avasoft 6.1. Режимы измерения:
*.ттт	trt: «Объем»
*.tit	tat: «Поглощение»
	ттт: «Пропускание»
	синица: «Сияние»

---

\*.wls ASCII-формат спектрометров VWR UV-1600PC, программное обеспечение: «M.wave professional»

---

### 3.2. Пункт меню [Открыть неизвестный двоичный файл]

Этот пункт меню поможет вам получить спектральную информацию из бинарных файлов с неизвестными форматами данных. После открытия неизвестного файла откроется предварительно отформатированный файл шаблона Excel. Содержимое неизвестного файла было помещено в буфер обмена. Вставьте это в ячейку A1 шаблона Excel. В первой строке показано имя вашего файла и путь к нему. Столбцы показывают содержимое файла

«как если бы» данные были в определенном числовом формате (поскольку существуют целочисленные типы и типы с плавающей запятой, имеющие разные размеры в байтах и порядок байтов). Полезный контент может отображаться в любом столбце, обычно блочно. При условном форматировании шаблон выделяет блоки данных с полезными числами.

### 3.3. Пункт меню [Вставить данные из буфера обмена]

С помощью этой функции вы можете переносить произвольные данные из Excel, Origin или даже любого текстового редактора в Spekwin32. Требуется только наличие как минимум двух столбцов, из которых хотя бы один содержит значения оси X.

Просто выберите нужный диапазон данных и скопируйте и вставьте в Spekwin32. Он будет работать с несколькими столбцами, принимаются форматы «хууу» и «хухуху». Типы осей можно определить в строке над столбцами данных. Типами по умолчанию являются «длина волны» и «поглощение», если не обнаружено никакой другой информации. При желании в строке над описанием типов осей могут быть названия спектров.

Намекать: В Excel используйте сочетание клавиш CTRL+SHIFT+Стрелка (вниз или вправо) для автоматического выбора целых блоков данных. Не выбирайте полностью пустые столбцы.

### 3.4. Пункт меню [Сохранить]

Этот пункт меню сохранит текущее содержимое окна графика. График будет сохранен с именем и типом файла, полученными при последнем использовании кнопки [Сохранить как...]. При первом использовании откроется диалоговое окно «Сохранить как...». появляться.

### 3.5. Пункт меню [Сохранить данные как]

Используется для сохранения данных отображаемых в данный момент спектров. Появится диалоговое окно «Сохранить как...» для имени, типа и пути файла.

На выбор предлагается 5 форматов файлов данных:

- `spv` для быстрого и компактного хранения и повторного чтения спектров в любом составе.
- `src` для сохранения отдельных спектров в довольно распространенном формате файлов Thermo Fisher.
- Файл `dx` для сохранения отдельных спектров в используемом во всем мире стандартном формате файла, предложенном IUPAC. JCAMP-DX.
- Файлы `dat` для импорта значений в графические программы, такие как Origin или Sigmaplot. Несколько Спектры интерполируются в один общий столбец `x`.
- CSV для удобного экспорта исходных спектральных данных в Excel и т.п. Множественные спектры содержат отдельные парные столбцы `xу`.

### 3.6. Пункт меню [Сохранить для RRUFF]

Для сохранения спектров комбинационного рассеяния света в собственный формат файла данных для базы данных минералов RRUFF ([http://rruff.info/about/about\\_download.php](http://rruff.info/about/about_download.php)). Их программное обеспечение CrystalSleuth позволяет создавать и поддерживать собственную базу данных спектров комбинационного рассеяния минералов с возможностью поиска.

Выберите спектр для экспорта в верхнем раскрывающемся списке и используйте либо параметры из входного файла, либо вставьте их самостоятельно. Кнопка [Сохранить] сохранит выбранный спектр в формате `*.rruff`. По завершении закройте окно с помощью кнопки [Заккрыть] .

### 3.7. Пункт меню [Пакетный экспорт данных]

Эта функция позволяет экспортировать все загруженные спектры в виде отдельных файлов спектров в трех форматах файлов (`*.src`, `*.dx`, `*.csv`). Кроме того, все спектры можно экспортировать вместе в виде нескольких файлов (одни и те же форматы файлов).

- экспортировать данные в виде отдельных файлов одного спектра или в виде общего нескольких файлов.
- Местоположение файла: выберите сохранение файлов в одном и том же месте (пути к файлам, в которых находились исходные файлы спектра) или вместе по пути к файлу, определенному в поле редактирования ниже.

- Новое имя файла может быть определено вместе с прикрепленной последовательной нумерацией, либо в качестве имен файлов могут использоваться тексты легенды. Оба варианта объединяются при выборе обоих.

Кнопка [Экспорт!] запускает процесс экспорта файла; прогресс будет отображаться в текстовом поле и с помощью индикатора выполнения ниже.

### 3.8. Пункт меню [Сохранить график как]

Используется для сохранения текущих спектров в виде спектрального графика. Появится диалоговое окно «Сохранить как...» для имени, типа и пути файла.

На выбор доступно 5 форматов графических файлов:

- CSV для удобного экспорта исходных спектральных данных в Excel и т.п. Несколько спектров содержатся в виде отдельных парных столбцов ху.
- GIF- файлы для сохранения в виде пиксельной графики, пригодной для использования в Интернете, сжатые файлы, 256 цветов, разрешение: 1350x900 пикселей.
- Файлы bmp для сохранения в виде пиксельной графики без потерь, большие файлы, разрешение: 1024x768 пикселей.
- WMF- файлы для сохранения в виде свободно масштабируемой векторной графики небольшого размера, рекомендуется лучше всего использовать для приложений Windows Office, таких как MS Word или MS PowerPoint.
- TIF- файлы для сохранения в виде небольших файлов, сжатых без потерь, с 32-битными цветами, лучше всего подходят для печати. ing, разрешение: 1350x900 пикселей.
- png для сохранения в виде небольших файлов, сжатых без потерь, формат интернет-изображений будущего, разрешение: 1350x900 пикселей.

#### Советы по оптимизированному экспорту графики:

- При экране с высоким разрешением и развернутом окне программы стандартные шрифты осей и условных обозначений могут выглядеть довольно маленькими в сохраненной графике. Попробуйте сохранить еще раз с помощью Spekwin32 среднего размера. окно.

### 3.9. Пункт меню [Сохранить для Gnuplot]

Создает два файла с одинаковым именем: файл параметров Gnuplot (\*.plt) и второй файл (\*.tat) со спектральными значениями. Файл параметров содержит необходимые команды для названия графика, названия и масштабирования осей, второй оси X, второй оси Y (если включена степень поляризации), положения поля легенды и создания файла EPS с тем же именем. Перед сохранением открывается диалог настройки этих параметров, куда также можно включить дополнительные команды.

Для этой функции в папке программы должны существовать следующие файлы параметров: gexit.plt, ginit.plt, ginit2.plt, ginit2d.plt, pola36.plt, polaset.plt, postcol.plt, postmon.plt, wlachse.plt, wlachse2.plt. Эта функция был протестирован с Gnuplot 4.6 для Windows (32-разрядной версии).

### 3.10. Пункт меню [Копировать данные в буфер обмена]

Скопируйте все данные из всех текущих спектров в буфер обмена. Оттуда его можно вставить в программное обеспечение для обработки текста или работы с электронными таблицами (например, MS Excel или Origin).

Спектральные данные будут сохранены в формате x..y..x..y.. (каждый спектр имеет свои парные значения xу). Если все спектры имеют одинаковые значения x, формат будет x..y..y.. (то есть: один столбец x для всех спектров). Первая строка содержит текст легенды, вторая строка содержит формат x и y для каждого спектр.

### 3.11. Пункт меню [Копировать графику в буфер обмена]

Текущее окно графика копируется в буфер обмена в виде векторной графики. Оттуда это может быть вставлен в программу обработки графики или текста. Для оптимизации графики см. подсказки в главе 3.5.

### 3.12. Пункт меню [Печать]

Печатает текущее окно графика. Выберите установленные принтеры, как обычно. Для оптимизации графики см. подсказки в главе 3.5. Файлы PostScript (\*.ps) можно создать путем печати в файл с помощью драйвера принтера PostScript.

### 3.13. Пункт меню [Выход]

Завершает программу. Несохранившиеся спектры теряются!

## Меню СПЕКТРА

### 3.14. Пункт меню [Общее]

Здесь вы можете изменить все параметры, важные для отображения спектров. Кроме того, можно установить длину пути поглощения и рассчитать концентрацию образца на основе молекулярной массы, веса образца и объема растворителя.

Все отображаемые значения и сделанные записи относятся к текущему спектру, выбранному в раскрывающемся списке вверху. Текущий спектр отображается в виде более толстой линии в окне графика.

- Название легенды: можно изменить в верхнем раскрывающемся списке для каждого спектра. С <Вверх> и клавишами <Вниз> вы можете прокручивать список заголовков легенд, то же самое работает с кнопками диалога [<= Назад] и [Вперед=>] . Конечно, спектры также можно выбрать напрямую в верхнем раскрывающемся списке. Все записи автоматически обновляются при внесении изменений в выбранный спектр. При выборе [Заменить по имени файла] заголовок легенды выбранного спектра будет заменен его именем файла.

С помощью [Изменить все заголовки...] вы можете работать со всеми заголовками легенд в одном окне. Символ «#» можно использовать в качестве подстановочного знака при поиске/замене. Там же можно заменить тексты легенд на имена файлов.

- **Ширина линии:** может быть установлена для любого спектра относительно общей ширины линии, которая изменено в пунктах меню [Толстые линии] и [Тонкие линии]. Для экспорта в виде графики и печати рекомендуется выбирать толщину линий от 2 до 5, в зависимости от результата обработки.  
распечатанный график.
- **Температура:** для некоторых типов спектральных файлов (\*.ggg, \*.gdm, \*.gkl, \*.gro) измеряемая температура показана природа. Вы можете ввести свои собственные значения.
- **Длина волны:** для некоторых типов спектральных файлов (\*.sp, \*.ggg, \*.prn, \*.spe) отображается длина волны. (длина волны возбуждения для спектров флуоресценции, длина волны обнаружения для спектров возбуждения).  
Вы можете ввести свои собственные значения. Единственный коммерческий тип файла, в котором указана длина волны, — это \*.sp (спектры флуоресценции Перкина-Элмера).
- **Тип линии:** возможны три типа линий, которые можно настроить для каждого спектра отдельно.
- **Цвет линии:** цвет линии текущего спектра отображается в вертикальном поле цвета справа. В палитре 14 различных цветов, которые можно менять бесконечно. Цвет линии можно задать для каждого спектра отдельно кнопкой [Изменить цвет =>]. Там вы также можете определить свои собственные цвета.
- **Длина пути поглощения:** стандартное значение  $d$  1 см . Изменения влияют на масштабирование оси  $Y$  с помощью  $\log()$  , а также на расчет концентрации через молярную десятичную дробь.  
коэффициент поглощения с помощью пункта меню [Концентрация] (4.9).
- **Концентрация:** стандартное значение – 0 моль/л. Для масштабирования по оси  $Y$  с помощью  $\log()$  необходимо ввести концентрацию с 0. После ввода значений молекулярной массы, массы образца и объема растворителя концентрацию можно рассчитать с помощью кнопки [Рассчитать].

### 3.15. Пункт меню [Информация]

Для спектра, выбранного в верхнем раскрывающемся списке, отображаются следующие свойства: путь к файлу, имя файла, дата, описание, комментарий1, комментарий2, тип спектра, растворитель, длина пути поглощения, концентрация, длина волны, температура, начальная длина волны, конечная длина волны, шаг. ширина, количество точек данных.

Текст в нижней части может быть скопирован.

### 3.16. Пункт меню [Нормализация]

Нормализация в этом контексте означает установку максимального значения у спектра равным 1.

Все спектры нормализованы к 1 при максимальной длине волны в отображаемом в данный момент диапазоне оси X. Чтобы выбрать определенный максимум для нормализации, увеличьте масштаб диапазона оси X, где этот максимум является самым высоким.

Нормализация изменяет значения у необратимо и может выполняться так часто, как вы захотите. Эта функция очень полезна для прямого сравнения спектров.

### 3.17. Пункт меню [Коррекция базовой линии]

Для коррекции смещения прямых базовых линий, отклоняющихся от нуля. Вызовите функцию и используйте функцию масштабирования мыши, чтобы выбрать диапазон, который должен быть установлен на 0. Среднее значение значений у в выбранной области будет вычтено из спектра как постоянное значение.

Коррекция базовой линии будет выполнена для всех спектров одновременно.

### 3.18. Пункт меню [Расширенный базовый план]

В случаях, когда простая коррекция смещения базовой линии не работает, эта функция меню предоставляет расширенные возможности.

В верхнем раскрывающемся списке выберите спектр для адаптации базовой линии.

Обработанный спектр будет добавлен в список спектров. Интерактивный предварительный просмотр в реальном времени помогает эффективно адаптировать базовую линию. В настоящее время существуют три различных типа базовой линии:

- Линейный вариант создает прямую базовую линию, которую можно вращать и сдвигать вверх и вниз.
- Адаптивная базовая линия будет наиболее полезна для спектров комбинационного рассеяния света и FTIR, где медленно кривую базовую линию необходимо вычестить из спектра с более узкими пиками. «Грубость» можно варьировать, а результат — сдвигать вверх и вниз.
- Раствор для рассеяния имеет базовую линию, постоянно возрастающую в сторону коротковолновых значений.  
Увеличение происходит по степенному закону, причем показатель степени зависит от размера частиц. Полученную базовую линию можно сжимать или расширять по вертикали, а также сдвигать вверх и вниз.

Доступны следующие настройки:

- [обработать все спектры] вычитает созданную базовую линию из всех загруженных спектров.
- [удалить оригинал] удаляет исходный спектр/спектры.
- [Сохранить легенду] позволяет сохранить исходный текст легенды без изменений. Если этот флажок не установлен, будет отображаться «(базовая линия скорректирована)».  
быть добавлен в текст(ы) легенды.
- [создать базовый спектр] создаст спектр на основе используемой базовой линии. Это можно лечить  
как и каждый спектр (сохранить и т.д.)

### 3.19. Пункт меню [Удаление шипов]

При использовании длительного времени экспозиции с ПЗС-детекторами артефакты космического излучения увеличиваются. Это так называемые космические спайки.

Эта функция обнаруживает всплески и интерполирует спектр в диапазоне всплеска. Все остальные точки спектральных данных остаются полностью неизменными. Спектры без всплесков также остаются неизменными. Широкие выбросы (> 5 точек данных, довольно редко) не обнаруживаются, чтобы не изменить спектральный диапазон функции.

Выберите спектр для обработки в верхнем раскрывающемся списке. Обработанный спектр будет добавлен в список спектров.

- [Удалить оригинал] удаляет исходный спектр.
- [Обработать все спектры] — для обработки всех спектров исходные спектры будут удалены.
- [Удаление обратного пика] позволяет алгоритму обнаружения перемещаться по спектру справа налево. левый. Таким образом можно обнаружить еще несколько пиков.
- [Добавить «выбросы удалены»] добавляет «выбросы удалены» к заголовку легенды спектра.

### 3.20. Пункт меню [Воспроизвести]

Это функция просто для развлечения. Значения  $y$  преобразуются в высоту тона и воспроизводятся слева направо через динамик корпуса. Скорость воспроизведения составляет 50 нм/секунду, независимо от разрешения спектра.

Вы можете даже воспроизводить настоящую музыку, выбрав подходящие значения  $y$  и длину волны.

### 3.21. Пункт меню [Сглаживание]

Для сглаживания всех спектров одновременно. Алгоритм эквивалентен использованию сглаживания Савицкого-Голея третьего полиномиального порядка из пункта меню «Расширенное сглаживание», однако интенсивность сглаживания зависит от разрешения спектров (параметр «интервал» будет сохраняться в пределах от 6 до 30 точек).

В список спектров добавляются сглаженные спектры, в заголовках легенд добавляется надпись «сглаженный».

Помните, что эта функция является подозрительной функцией, поскольку она означает изменение и замалчивание исходных данных.

### 3.22. Пункт меню [Расширенное сглаживание]

Для лучшего контроля над поведением сглаживания. В верхнем раскрывающемся списке выберите спектр, который необходимо сгладить. Обработанный спектр будет добавлен в список спектров. В настоящее время существуют три различных типа сглаживания:

- [скользящее среднее] сглаживается путем вычисления среднего значения для каждой точки данных из диапазона данных вокруг этой точки с выбранным размером интервала. Можно выбрать прямоугольную или треугольную форму. Благодаря треугольной форме более удаленные точки данных имеют пониженный вес.



- [Савицкий-Голай] сглаживает путем вычисления значения интерполяции полинома наименьших квадратов для каждую точку данных. Размер интервала и порядок полинома можно выбрать.
- [Фильтр процентилей] сглаживает, определяя выбранный процентиль для точек данных, содержащихся в размер интервала последовательно для каждой точки данных. Нижний или верхний спектр огибающей получается при выборе процентиля 0% или 100%.

Также доступны следующие настройки:

- [обработать все спектры] сглаживает все загруженные спектры с выбранными параметрами.
- [удалить оригинал] удаляет исходный спектр/спектры.

### 3.23. Пункт меню [Пики и FWHM]

Выберите спектр в верхнем раскрывающемся списке. В нижней части будет показана таблица пиков. Если возможно, будут показаны соответствующие значения FWHM (полная ширина на половине максимума). Порог обнаружения пика варьируется от 1 до 95%. Для нахождения минимумов активируйте инвертированную кнопку [ ]. флажок.

Текст в нижней части можно скопировать методом копирования и вставки с помощью мыши или кнопки [Копировать пиковые данные].

### 3.24. Пункт меню [Интеграция]

После вызова этого пункта меню с помощью мыши увеличьте масштаб интегрируемого диапазона оси X. Левая и правая границы поля масштабирования являются целочисленными границами. Для каждого спектра отображается отдельное окно сообщений, содержащее границы, интегральное значение спектра и среднее значение в пределах выбранного диапазона.

Намекать: Сила колебаний будет показана дополнительно, если выбраны волновые числа типов осей и коэффициент поглощения. Разумеется, значение силы колебаний имеет смысл только при выборе для интегрирования первого электронного перехода. Для расчета силы колебаний  $f$  используется следующая формула:

$$f = \frac{4 \pi^2 \nu_{\text{max}}^2 \ln 10}{\epsilon^2 N_A} \left( \frac{1}{\text{Д}} \sim \right) \quad 4,319 \cdot 10^{-9} \frac{\text{мол} \cdot \text{см}^2}{\text{л}} \left( \frac{1}{\text{Д}} \sim \right)$$

### 3.25. Пункт меню [Отрезать часть спектра]

Для уменьшения спектрального диапазона (шкала x). В среднем раскрывающемся списке выберите спектр, который нужно вырезать, и введите границы. Обработанный спектр будет добавлен в список спектров. Новые спектральные границы будут сохраняться до тех пор, пока работает программа.

- при «всех спектрах одного типа» можно обрабатывать все спектры определенного типа одновременно.

- [удалить оригинал(ы)] удаляет исходный спектр/спектры.
- [prepend «part of:»] добавляет «part of:» к названию легенды спектра/спектров.

### 3.26. Пункт меню [Сортировка]

Для изменения порядка загрузки спектров. В левом окне порядок спектров можно изменить вручную.

Используйте левую кнопку мыши для выбора (используйте SHIFT для выбора нескольких спектров). Вставьте выделенные спектры правой кнопкой мыши (над спектром, на который указываете). С опцией [автоматически] все спектры можно автоматически отсортировать по трем критериям в обоих направлениях:

- <Направление> можно применить ко всем спектрам (доступны как в алфавитном, так и в обратном алфавитном порядке).
- <Температура> только для спектров наших самодельных спектрометров.
- <Длина волны> для некоторых спектров наших самодельных спектрометров и Perkin Elmer \*.sp спектры, если измерять флуоресцентным спектрометром. Для файлов \*.spe будет отображаться длина волны лазера, если они относятся к рамановскому типу. Доступно направление вверх и вниз.

### 3.27. Подменю [Удалить]

#### 3.27.1. Пункт меню [Удалить все]

Все загруженные спектры удаляются. Вы должны подтвердить это, прежде чем удаление произойдет на самом деле.

#### 3.27.2. Пункт меню [Выбрать для удаления]

Для удаления произвольных спектров из текущего графика. Слева выберите спектры для удаления, переместите их вправо кнопкой [>]. С помощью [>>] вы можете одновременно перенести все спектры слева направо. То же самое справедливо для [<] и [<<] для противоположного направления.

С опцией «удалить все спектры одного типа» вы можете удалить сразу все спектры определенного типа.

#### 3.27.3. Пункт меню [Удалить последний спектр]

Последний спектр из списка спектров будет удален.

## 4. Меню РАСЧЕТЫ

### 4.1. Пункт меню [Дополнение]

Значения у двух спектров, выбранных в раскрывающемся списке, будут добавлены. [все спектры] выполнит операцию со всеми присутствующими спектрами, взяв для расчета спектр, выбранный в нижнем раскрывающемся списке. Новый спектр будет добавлен в список спектров, его легенда будет называться «Добавление». [Сохранить текст легенды] сохранит исходный текст легенды для результирующего спектра.

Начальная и конечная длина волны нового спектра будут определяться диапазоном перекрытия двух выбранных спектров, ширина шага по оси X берется из верхнего спектра.

#### 4.2. Пункт меню [Вычитание]

Значения у спектра, выбранного в нижнем раскрывающемся списке, будут вычтены из значений у спектра, выбранного в верхнем раскрывающемся списке. [Все спектры] выполнит операцию со всеми присутствующими спектрами, взяв для расчета спектр, выбранный в нижнем раскрывающемся списке. Новый спектр будет добавлен в список спектров, его легенда будет называться «Вычитание». [Сохранить текст легенды] сохранит исходный текст легенды для результирующего спектра. Начальная и конечная длина волны нового спектра будут определяться диапазоном перекрытия двух выбранных спектров, ширина шага по оси X берется из верхнего спектра.

#### 4.3. Пункт меню [Умножение]

Значения у двух спектров, выбранных в раскрывающемся списке, будут умножены друг на друга. [Все спектры] выполнит операцию со всеми присутствующими спектрами, взяв для расчета спектр, выбранный в нижнем раскрывающемся списке. Новый спектр будет добавлен в список спектров, его легенда будет называться «Умножение». [Сохранить текст легенды] сохранит исходный текст легенды для результирующего спектра. Начальная и конечная длина волны нового спектра будут определяться диапазоном перекрытия двух выбранных спектров, ширина шага оси x берется из верхнего спектр.

#### 4.4. Пункт меню [Подразделение]

Значения у спектра, выбранного в верхнем раскрывающемся списке, будут разделены на значения у спектра, выбранного в нижнем раскрывающемся списке. [Все спектры] выполнит операцию со всеми присутствующими спектрами, взяв для расчета спектр, выбранный в нижнем раскрывающемся списке. Новый спектр будет добавлен в список спектров, его легенда будет называться «Деление». [Сохранить текст легенды] сохранит исходный текст легенды для результирующего спектра. Начальная и конечная длина волны нового спектра будут определяться диапазоном перекрытия двух выбранных спектров, ширина шага по оси X берется из верхнего спектра.

#### 4.5. Пункт меню [Усреднение спектров]

Значения у выбранных спектров (левая кнопка мыши) будут усреднены. Новый спектр будет добавлен в список спектров, заголовок легенды можно задать в нижнем поле редактирования.

#### 4.6. Пункт меню [Константы Y]

Примените один из четырех типов расчета к спектру, выбранному в верхнем раскрывающемся списке. Новый спектр будет добавлен в список спектров. Доступны следующие варианты:

- при «всех спектрах одного типа» можно обрабатывать все спектры определенного типа одновременно.

- [удалить оригинал(ы)] удаляет исходный спектр/спектры.

- [append "+ | - | × | ÷ | n | "] добавляет тип расчета и цифру к заголовку легенды  
новый спектр/спектры.

Намекать: предназначена для умножения на <sup>2</sup>соотв. <sup>4</sup>введите x2 соответственно. x4 в поле редактирования. Эта функция  
полезно, когда вам нужно отобразить спектры флуоресценции в волновых числах. Обычно вы можете умножить <sup>n</sup>, введя xp (n:  
копировать с <sup>n</sup>действительное число). Другие типы расчета также применимы.

## 4.7. Пункт меню [Константы X]

В зависимости от выбранного типа расчета вы можете перемещать спектры влево/вправо, растягивать и сжимать по оси x. Эта функция  
работает только в том случае, если исходный тип оси X спектра идентичен текущему типу оси X, отображаемому в окне графика. Новый  
спектр будет добавлен в список спектров, к его названию легенды будет добавлен тип расчета и рисунок из списка.

поле редактирования.

Намекать: Пожалуйста, используйте эту функцию только в том случае, если вы действительно знаете, что делаете, поскольку она изменяет  
спектры довольно необычным образом.

## 4.8. Пункт меню [Производная]

Будет рассчитана первая, вторая, третья или четвертая производная спектра, выбранного в раскрывающемся списке. Новый спектр будет  
добавлен в список спектров, а его заголовок легенды будет дополнен знаком «х.

Производная». Доступны следующие варианты:

- с помощью «получить все спектры» можно обрабатывать все спектры одновременно.
- [удалить оригинал(ы)] удаляет исходный спектр/спектры.
- [сглаживание перед деривацией] использует сглаженный спектр для производной функции. Эта особенность  
практически исключает влияние шума измерения.

Намекать: Производные даже более высокого порядка можно получить путем повторного вывода полученных спектров.

Опцию сглаживания настоятельно рекомендуется использовать для всех производных, превышающих первую производную.

## 4.9. Пункт меню [Пропускание/Отражение]

Из двух спектров интенсивности (образца и фона/эталона) коэффициент пропускания или отражения будет рассчитан после  $T = I/I_0$ .

## 4.10. Пункт меню [Степень поляризации]

При обработке поляризационно-зависимых спектров флуоресценции и возбуждения часто необходимо рассчитать степень поляризации  
и приведенный спектр.

Это можно сделать по двум спектрам с разной ориентацией поляризатора согласно следующим уравнениям:

$$P = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}} \quad (1)$$

$$G = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}} \quad (2)$$

C: G : уменьшенный спектр

P : степень поляризации

I<sub>∥</sub> : интенсивность флуоресценции со скрещенными поляризаторами.

I<sub>⊥</sub> : интенсивность флуоресценции с параллельными поляризаторами.

Два спектра выбираются в двух раскрывающихся списках. Новый спектр будет добавлен в список спектров, заголовок легенды нового спектра состоит из названия легенды спектра и нового спектрального типа.

Чтобы рассчитать все спектры одновременно, используйте опцию [все]. Это работает только для спектров типа \*.ggg.

#### 4.11. Пункт меню [Рамановский сдвиг]

Здесь вы можете рассчитать спектр комбинационного смещения на основе спектра интенсивности (флуоресценции) в шкале длин волн и указав длину волны лазерного возбуждения. Поскольку область около 0 см<sup>-1</sup> обычно искажается из-за самого лазерного излучения, вы можете определить начальное волновое число спектра комбинационного рассеяния света. Доступны еще два варианта:

- [преобразование всех спектров] применяет преобразование ко всем загруженным спектрам одновременно.
- [удалить оригинал(ы)] удаляет исходный спектр/спектры длин волн с отображения.

#### 4.12. Пункт меню [Концентрация]

Помимо пункта меню [Общие] (3.14) это вторая возможность установить концентрацию для определенного спектра. Для этой функции необходимо знать молярный коэффициент поглощения.

Расчет концентрации выполняется с помощью Ламберта-Бера (уравнение (6)).

Все введенные значения применяются только к спектру, выбранному в верхнем раскрывающемся списке. После ввода молярного коэффициента поглощения, длины волны и длины пути поглощения вы можете рассчитать концентрацию с помощью кнопки [Рассчитать]. Максимум текущего спектра можно ввести автоматически с помощью кнопки [Вставить пик].

Намекать: Для непосредственного ввода концентрации используйте пункт меню [Общие] (3.14).

### 4.13. Пункт меню [Эффективное поглощение]

Для определения квантовых выходов флуоресценции важно знать долю света, поглощенную образцом. Из-за конечной полосы пропускания возбуждающего света ее необходимо усреднить по всему диапазону полосы пропускания, что дает «эффективное поглощение».

Используется следующая формула:

$$A_{\text{эфф}} = \frac{\int A(\lambda) I(\lambda) d\lambda}{\int I(\lambda) d\lambda} \quad (3)$$

с  $A(\lambda)$  : спектр поглощения

$I(\lambda)$  : полоса пропускания возбуждающего света

Обычно полоса пропускания представляет собой треугольную функцию, характеризующуюся центральной длиной волны и полосой пропускания. ширина.

### 4.14. Пункт меню [Центр тяжести]

Для спектра, выбранного в раскрывающемся списке, будет рассчитан центр тяжести. Я. е. среднее значение  $x$  соотв. взвешенные по значениям  $A(\lambda)$  (поглощение  $A(\lambda)$  соответственно  $A(\lambda)$ ) после

следующее уравнение:

$$\frac{\int A(\lambda) \lambda d\lambda}{\int A(\lambda) d\lambda} \text{ соотв. } \sim \frac{\int A(\tilde{\lambda}) \tilde{\lambda} d\tilde{\lambda}}{\int A(\tilde{\lambda}) d\tilde{\lambda}} \quad (4)$$

Текущий диапазон оси X будет использоваться в качестве границ интегрирования. Результат будет показан в средней части строки состояния.

Намекать: центр тяжести в шкале длин волн не соответствует обратному центру тяжести в шкале волновых чисел:

$$\langle \lambda \rangle \neq \langle \tilde{\lambda} \rangle!$$

### 4.15. Пункт меню [Толщина пленки]

По спектру отражения белого света, показывающему интерференцию, можно рассчитать толщину однослойной тонкой пленки. В качестве входных значений необходим показатель преломления материала пленки вместе с углом падения отраженного света (перпендикулярное освещение означает угол  $0^\circ$ ). Используемый диапазон длин волн можно изменить.

Окно результатов содержит входные данные, количество оцененных пиков и рассчитанную толщину вместе с показателем качества (StDev). Значение StDev выше нескольких процентов от значения толщины указывает на неверный результат.

Намекать: Это новая экспериментальная функция; обратная связь с пользователем крайне необходима и важна для будущего развития этой функции! Не используйте этот метод без перекрестной проверки результатов альтернативным методом!

#### 4.16. Пункт меню [Квантовый выход]

Этот пункт меню слишком сложен, чтобы объяснять его здесь. Спросите меня напрямую за объяснениями.

#### 4.17. Пункт меню [Низк. темп. Квантовый выход]

Полезное объяснение выходит за рамки данного руководства.

### 5. Меню флуоресценции/ЭЭМ.

#### 5.1. Пункт меню [Коррекция чувствительности излучения]

Для коррекции чувствительности детекторов флуоресцентных спектрометров, зависящей от длины волны. Эта функция дает «истинные спектры».

Загрузите коррекционную кривую кнопкой [Загрузить коррекционную кривую] (файл \*.fak, должен состоять из пар XY с чувствительностью к длине волны). В среднем раскрывающемся списке выберите спектр, который необходимо исправить. Исправленный спектр будет добавлен в список спектров, в названии легенды будет добавлена надпись «исправленный».

- [удалить оригинал] удаляет исходный спектр.
- [исправить все] корректирует все загруженные спектры и удаляет исходные спектры.

#### 5.2. Пункт меню [Назначение длины волны возбуждения]

Для полезной обработки набора спектров флуоресценции как двумерного спектра или ЕЕМ (матрицы возбуждения-излучения) каждому спектру необходимо назначить свою длину волны возбуждения. Это можно ввести вручную для каждого спектра в пункте меню [Общие] (3.14) или автоматически для полного набора спектров из этого пункта меню. Просто введите длину волны возбуждения первого спектра и ширину шага возбуждения. Если ваш набор ЕЕМ содержит только часть загруженных спектров, выберите первый и последний спектр набора в двух раскрывающихся списках. Чтобы назвать тексты легенд спектров длиной волны возбуждения, активируйте опцию «Заменить имена спектров...».

флажок.

#### 5.3. Пункт меню [Коррекция интенсивности возбуждения]

Для коррекции зависящей от длины волны интенсивности возбуждения (спектра лампы) спектрометров флуоресценции для серии спектров флуоресценции с известной длиной волны возбуждения.

Загрузите кривую коррекции лампы кнопкой [Load Lamp Spectrum]. Выберите диапазон спектров, подлежащих коррекции, с помощью двух раскрывающихся списков. Скорректированные спектры заменят исходные спектры, к их названиям условных обозначений будет добавлена надпись «Интенсивность возбуждения скорректирована».

Намекать: Длину волны можно ввести вручную для каждого спектра в пункте меню [Общие].

## 5.4. Пункт меню [Удалить рэлеевское/рамановское рассеяние]

Достаточно часто, особенно для образцов с малой интенсивностью флуоресценции, ЭЭМ искажаются пиками рассеяния. Они возникают в результате рэлеевского рассеяния первого и второго порядка, а также комбинационного рассеяния и не могут быть полностью подавлены даже путем выбора оптимальной геометрии контейнера для образца и оптических путей. Для дальнейшего использования в хемометрическом анализе необходимо устранить рассеяние. Традиционно это делалось путем установки областей рассеяния на ноль, но есть гораздо лучшие способы уменьшить влияние рассеянного света.

Этот пункт меню позволяет сразу удалить все разбросы из всего набора EEM с помощью следующих опций:

- [обработать все спектры] применяет обработку ко всем загруженным спектрам одновременно.
- [удалить оригинал(ы)] удаляет исходный спектр/спектры с отображения.
- С помощью [replace by] вы можете заменить значения области рассеяния на
  - о нули, это традиционный и самый уродливый способ сделать это
  - о прямая линия, что может быть лучше в некоторых случаях
  - о интерполированная кривая, которая наиболее полезна, поскольку дает наименьшее искажение. интерполированные значения имеют тот же уровень шума, что и окружающие их значения.
- установите полосу возбуждения вашего спектрометра, это определяет ширину заменяемого
  - область ценностей
- [удалить пики Рэля (1-го порядка)] удаляет интенсивность рассеяния вокруг вашего возбуждения
  - длины волн (видны, потому что ваш образец делает это)
- [удалить пики Рэля (2-й порядок)] удаляет интенсивность рассеяния примерно в два раза больше длины волны возбуждения (видно, потому что ваш монохроматор излучения пропускает рассеянный свет 1-го порядка в диапазон длин волн 2-го порядка)
- [удалить пики комбинационного рассеяния света (1-й порядок)] удаляет интенсивность рассеяния вокруг длин волн возбуждения, сдвинутых в результате комбинационного рассеяния света. Разница длин волн зависит от растворителя, некоторые растворители можно выбрать из раскрывающегося списка. Вы можете включить другие растворители, отредактировав файл «Raman-Bands.csv» из папки программы Spekwin32.



## 5.5. Пункт меню [Вычесть пустой набор данных EEM]

Возможно, будет полезно вычесть флуоресцентные свойства «холостого» образца из EEM, который вы хотите проанализировать. Это можно успешно использовать для устранения фоновой флуоресценции, а также пики рассеяния.

В верхней части вы можете увидеть размеры вашего текущего комплекта EEM. Загрузите пустой набор данных, который нужно вычесть, с помощью [Загрузить пустой набор данных...]. Естественно, это будет работать только в том случае, если размеры обоих наборов данных идентичны. При желании к текстам легенды можно добавить «пробел вычитается».

## 5.6. Пункт меню [Показать 2D-спектр (EEM)]

Для двумерного отображения серии спектров флуоресценции или возбуждения. EEM означает: матрица излучения возбуждения. Спектры должны быть привязаны к длине волны и предварительно скорректированы на интенсивность возбуждения (см. выше).

Текущее положение мыши показано в левом нижнем углу в виде значений возбуждения, излучения и интенсивности. Справа есть несколько вариантов отображения. По умолчанию возбуждение ориентировано горизонтально, излучение – вертикально. Эту ориентацию можно изменить, используя [switch x <=> y оси] вариант. График EEM можно скопировать в буфер обмена с помощью [Копировать => Буфер обмена]. Распечатать или сохранить график в данный момент нельзя, осей нет.

## 5.7. Пункт меню [Рассчитать спектры возбуждения]

Для расчета серии спектров возбуждения из серии спектров флуоресценции. Спектры должны быть привязаны к длине волны и предварительно скорректированы на интенсивность возбуждения (см. выше).

Введите диапазон и ширину шага длин волн обнаружения для спектров возбуждения. Спектры флуоресценции будут удалены, если установлен флажок [Удалить спектры флуоресценции].

## 6. Меню GaussFit

Эти функции были практически без изменений переняты из 16-битной версии Spekwin. Они работают, но не безупречно.

Для моделирования спектров с помощью групп кривых типа Гаусса и аппроксимации реальных спектров. Будет работать с волновыми числами только как тип оси X.

### 6.1. Пункт меню [Вручную]

Здесь делается настоящая работа. Руководящий документ доступен на веб-сайте Spekwin32.

## 6.2. Пункт меню [Открыть]

Открыть ранее сохраненный набор данных спектров Гаусса (\*.gss).

## 6.3. Пункт меню [Сохранить]

Сохранить текущий набор данных спектров Гаусса.

## 7. Меню ГРАФИК/ОПЦИИ.

### 7.1. Пункт меню [Конфигурация]

Здесь вы можете изменить и установить навсегда многие опции программы. Настройки записываются в файл spekwin32.ini в папке с программой. Для этого файла необходим доступ на запись! При запуске программы эти настройки считываются из файла. Без доступа для записи настройки можно читать, но нельзя записывать. Рекомендуется устанавливать Spekwin32 в папку с доступом на запись.

Если активировано [разрешить несколько экземпляров], не рекомендуется загружать много спектров одновременно двойным щелчком мыши в проводнике. При этом откроется столько окон Spekwin32, сколько файлов было выбрано, что может неприятно замедлить производительность системы

### 7.2. Пункт меню [Показать метки пиков]

Активация этого пункта меню приведет к появлению дополнительной строки меню для всех опций, связанных с функцией автоматической маркировки пиков.

- Показать метку позволяет использовать значения x или y или оба вместе в качестве метки пика.
- Порог определяет минимальное значение для помеченных пиков. Это процентный порог, рассчитываемый для каждого спектра индивидуально.
- Выдаемость – параметр, позволяющий точно настроить выбор пиков для маркировки. Работает аналогично параметру «топографическая известность», используемому для описания горных вершин.
- С помощью функции «Цифры» вы можете настроить точность отображаемых значений.
- Угол текста метки можно варьировать от вертикального до горизонтального.
- Вы можете либо пометить пики для всех спектров, либо выбрать один.

Намекать: Нет возможности индивидуально маркировать пики!

### 7.3. Пункт меню [Показать вид спектроскопа]

«Вид спектроскопа» пытается воспроизвести внешний вид измеренного образца, наблюдаемого через ручной спектроскоп. Они до сих пор широко используются в некоторых отраслях, особенно геммологами. Это может оказаться полезным для сокращения разрыва между визуальными и спектрометрическими измерениями.

методы. Эта функция работает как для спектров поглощения или пропускания, так и для эмиссии.

спектры.

Активация этого пункта меню отобразит дополнительную строку меню под графиком для всех опций, связанных с представлением спектрографа. Показан полностью развернутый «радужный спектр» с уменьшенной яркостью в соответствии с поглощающими областями выбранного спектра.

- В радужном спектре шкалу длин волн можно отключить, а расстояние деления измененный.
- Спектр цветной радуги можно отобразить в оттенках серого (для тех, у кого есть черно-белые экраны и бесцветные учебники )
- [Выравнивание] выравнивает график верхнего спектра по нижнему спектру радуги. В зависимости от монитора и размера окна это не всегда может работать идеально...
- При выборе [активировать] модуляция полного спектра радуги измеренным спектром можно включать и выключать. Выберите спектр из раскрывающегося списка.
- С помощью [CopyToClipboard] вы можете поместить текущий спектр радуги в буфер обмена.
- [Сохранить как...] сохранит текущий спектр радуги на жесткий диск.

Намекать: Значения пропускания выше 1 (что физически бессмысленно) приводят к искажению цветов.

Спектры излучения должны быть нормализованы или поддерживаться ниже 1 для значений у, иначе цвета также будут искажены. искаженный.

## 7.4. Пункт меню [Оси]

Для взаимного преобразования различных типов осей и присвоения названий названиям осей. По оси x длина волны и масштаб волновых чисел можно выбрать. Волновые числа и электронвольты пропорциональны энергии.

Следующее уравнение справедливо, если единицы измерения оси — нм и 1/см:

$$\frac{10^7}{\sim} \text{ и } \sim \frac{10^7}{\sim} \quad (5)$$

Кроме того, возможно преобразование оси в электрон-вольты (эВ). Расчет такой: 1эВ=8065,5см<sup>-1</sup>. Существует возможность вручную установить границы оси X в [границы] окно.

Значения по оси Y могут быть показаны как коэффициент пропускания T, коэффициент поглощения A, молярный коэффициент поглощения ε. и log (коэффициент поглощения) log ε. Для взаимного преобразования используются следующие уравнения:

$$A \quad \log T \text{ и } A \text{ cd} \quad (6)$$

Для отображения эпсилон и логарифмического эпсилон вам необходимо присвоить спектру концентрацию. Это можно сделать в пунктах меню [Общие] (3.14) или [Концентрация] (4.12). Кроме того, Spekwin32 распознает и обрабатывает типы у «Отражение» и «Интенсивность».

Если возможно, типы осей x и y выбираются автоматически в соответствии с последним открытым файлом спектра.

Отображение названий осей можно отключить с помощью опции [показать название оси]. Установите свой собственный заголовок оси с помощью [Set Axis Title].

Опция [Альтернативная галочка] включена по умолчанию, если она установлена в пункте меню [Конфигурация].

## 7.5. Пункт меню [Шрифт осей]

Для изменения шрифта галочек обеих осей.

## 7.6. Пункт меню [Шрифт легенды]

Для изменения шрифта заголовков осей и заголовков легенд.

Намекать: При выборе очень большого размера шрифта заголовки осей и метки осей могут перекрываться.

## 7.7. Пункт меню [Легенда вкл/выкл]

Для включения и выключения отображения названий легенд.

## 7.8. Пункт меню [Сетка вкл/выкл]

Для включения и выключения отображения сетки.

## 7.9. Пункт меню [Вторичная ось X вкл/выкл]

Для включения и выключения дополнительной второй оси X у верхнего края окна графика.

## 7.10. Пункт меню [Точки/Линии]

Для переключения спектрального отображения в виде точек или линий.

## 7.11. Пункт меню [Перевернуть ось X]

Для переключения направления оси X. Затронет только графическое отображение. Данные будут сохранены по умолчанию направление.

## 7.12. Пункт меню [Стандартные линии и цвета]

Для возврата спектрального отображения к значениям по умолчанию. Для цветов установлен порядок по умолчанию, ширина линии — 1, а стиль линии — «сплошной».

## 7.13. Пункт меню [более толстые линии]

Увеличьте ширину линии на единицу. Возможный диапазон от 1 до 7.

#### 7.14. Пункт меню [Тонкие линии]

Уменьшите ширину линии на единицу. Возможный диапазон от 1 до 7.

#### 7.15. Пункт меню [Печать полностью черным]

Установите цвет линий всех спектров на черный. Чтобы вернуться назад, вызовите пункт меню [Стандартные линии и цвета] один раз.

#### 7.16. Пункт меню [Типы велосипедных линий]

Устанавливает чередование типов линий всех спектров между «сплошной», «пунктирной» и «пунктирной». Чтобы вернуться назад, вызовите один раз пункт меню [Стандартные линии и цвета] .

#### 7.17. Пункт меню [Отображаемые значения]

Постоянно показывает текущее значение  $x$  и  $y$  для спектра, выбранного в раскрывающемся списке.

Закройте кнопкой [Прервать].

#### 7.18. Пункт меню [Цвет фона]

Для изменения цвета фона графика. Цвет фона не будет отображаться, экспортироваться или сохраняться, фон останется прозрачным!